

Applications of Spring-Mass Model on Crystalline Lattices

Roberto Augusto Del Carpio Minaya
Programa de Doctorado en Computación
Universidad Nacional del Altiplano (UNAP)
Puno, Perú
Email: rdelcarpio1969@hotmail.com

Yalmar Ponce Atencio
Programa de Doctorado en Computación
Universidad Nacional del Altiplano (UNAP)
Puno, Perú
Email: yalmar@gmail.com

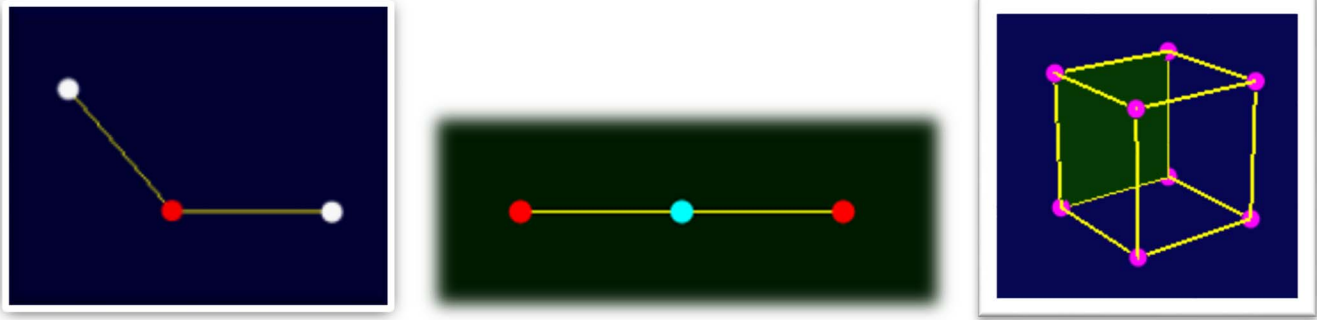


Fig. 1. Distintos tipos de configuraciones de masas propuestos para la simulación.

Abstract – In this work we present a study of different one-dimensional, two-dimensional and three-dimensional arrangements of masses coupled by springs, to which are made to vibrate by small oscillations, achieving a vibration over the entire system called “mode of vibration”. To achieve the vibrations, the model Spring-Mass is used, that is a proposed mathematical-physical model by using systems of linear differential equations of second degree with constant coefficients, considering the forces applied to the masses as linear-elastic restitution forces with small displacements. Then the system is discretized and solved numerically by using the Euler-Cromer integration method. In order to experiment, we simulating the vibration of different periodic molecular configurations, where the ions are connected to each other by means of ideal springs. Each ion in the network vibrates as if it were a harmonic oscillator, so it is possible to analyze the dynamic lattice properties, such as the normal modes.

Keywords – Spring-mass, mode of vibration, Euler– Cromer integrator.

I. INTRODUCCIÓN

En la naturaleza los fenómenos vibracionales se presentan en todas las ramas de la física tal como en mecánica clásica, mecánica cuántica, física del sonido, óptica física, electromagnetismo y física del estado sólido.

Planteemos de una forma muy sencilla e intuitiva lo que es una vibración. Una vibración se puede considerar como un movimiento repetitivo de una masa realizado alrededor de una posición donde se supone que las fuerzas actuantes son nulas, llamada también posición de equilibrio. Las vibraciones definidas de esta manera se pueden observar, por ejemplo, en

las vibraciones de la carrocería de un vehículo, en estructuras de concreto, en estructuras metálicas, en el hardware de los computadores y en la vibración de moléculas.

Un tipo de vibración muy especial es el llamado Movimiento Armónico Simple (MAS), que se caracteriza principalmente por realizar pequeños desplazamientos proporcionales a la aceleración. Con este MAS se puede implementar un modelo físico matemático llamado Spring-Mass (Masa-Resorte) que consiste en colocar en los extremos de uno o varios resortes, masas intercaladas a manera de una red interconectada, de tal manera que al hacer vibrar una de las masas, esta vibración se propague en toda la estructura, lográndose una vibración en conjunto muy especial.

Se han realizado varios estudios de fenómenos vibracionales considerando el modelo Spring-Mass. Por ejemplo en Biomecánica [1- 3] se han realizado estudios en los cuales se aproxima la locomoción del ser humano a un arreglo de resortes obteniéndose resultados que hacen factible la aplicación a la locomoción en Robótica. Otro ejemplo en Simulación Gráfica [4-6] lo constituye la animación de objetos deformables como una tela en movimiento, en la cual la superficie de la tela se aproxima mediante un arreglo en red de resortes con masas acopladas, al observar la simulación se observa un movimiento ondulatorio muy realista. Otra aplicación en este mismo campo de simulación gráfica son simulaciones de movimiento del cabello humano, que aunque es muy complejo por el gran número de pelo que tenemos en la cabeza, se obtuvieron resultados aceptables con el método masa-resorte. En Física del Estado Sólido [7-9] se han realizado estudios de estructuras moleculares y propagación de ondas utilizando el modelo masa resorte, por ejemplo, se han derivado ecuaciones de movimiento para los átomos de una red cristalina

de estructura de diamante con aproximación armónica obteniéndose diversas propiedades para los fonones.

Centrándonos un poco más en el objetivo del presente trabajo, en la formación de un cristal atómico, se sabe que los átomos se distribuyen u ordenan en la posición de mínima energía en el cristal, por consiguiente cada átomo se encuentra en un mínimo del potencial creado por el resto de los átomos que constituyen el cristal [10]. A esto llamamos el estado base. Podemos asemejar esto a cuando juntamos un conjunto de canicas y las soltamos dentro de un plato hondo semiesférico, notaremos que las canicas se moverán alrededor de la parte más honda del plato, hasta que finalmente todas quedarán quietas en el fondo del plato. Ese es el mínimo de potencial.

Se sabe que a temperaturas muy bajas, la forma en que dos iones o átomos interactúan o se mueven, es semejante a como si éstos estuvieran unidos por medio de un resorte con fuerzas de restitución elástica lineal o comúnmente llamada Ley de Hooke. De esta manera los átomos al desplazarse ligeramente de su posición de equilibrio pueden vibrar aproximadamente de acuerdo a un modelo de oscilador armónico.

Aplicando este modelo para los átomos de un cristal, podemos realizar el estudio del material considerándolo como un arreglo periódico de iones donde cada ión queda unido a otro mediante un resorte, resultando así la red de iones como un arreglo de osciladores armónicos.

De ésta manera, es posible implementar el modelo Spring-Mass a cualquier cristal y lograr que algunas propiedades dinámicas de la red de iones en el material pueda ser estudiada como una red de osciladores armónicos acoplados mediante resortes de rigidez constante (lineales). Este tipo de arreglos de osciladores armónicos presenta los llamados modos normales de vibración en la cual todas las partículas de la red oscilan con la misma frecuencia. El estudio de estructuras moleculares de este tipo es un tópico de investigación muy importante [11] debido a que muchas de las propiedades físicas de los materiales sólidos dependen del ordenamiento atómico y de los modos vibracionales de las moléculas que los componen [12].

Ahora, determinar analíticamente estos modos normales es muy complicado y debe utilizarse la Mecánica Cuántica para tal efecto ya que se trata de un estudio de partículas microscópicas. Muchas veces se recurren a métodos numéricos para obtener soluciones que puedan interpretarse y obtener alguna utilidad en la comprensión del fenómeno.

El objetivo de este trabajo es justamente resolver numéricamente la vibración de distintas configuraciones cristalinas (ver Fig. 1), pero no desde el punto de vista mecánico cuántico, si no utilizando herramientas mecánico clásicas, teniendo cuidado de considerar sólo resultados clásicos que sean compatibles con resultados cuánticos. Sabemos que en mecánica cuántica sólo algunos resultados de vibración de moléculas son factibles, por lo que consideraremos esos resultados en nuestro modelo spring-mass. Finalmente, en

base a la solución del modelo propuesto, se realizarán animaciones gráficas de vibraciones moleculares para percibir, cualitativamente hablando, el comportamiento microscópico de los sólidos cristalinos.

II. PRELIMINARES

Un tipo de cristal particularmente interesante es el del tipo cúbico simple (ver Fig. 2).

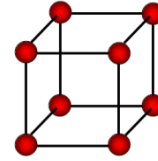


Fig.2. Cristal tipo cúbico simple.

Aplicando el modelo Spring-Mass a un sistema cristalino cúbico, se puede visualizar a éste como un conjunto de átomos (las masas) unidos todos ellos mediante resortes ideales (las fuerzas), tal como se muestra en la Fig. 3.

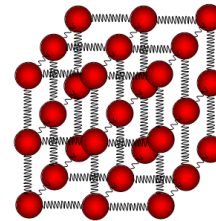


Fig.3. Modelo de Spring-Mass para un cristal cúbico

A. Osciladores armónicos unidimensionales

Consideremos un conjunto de tres masas m dispuestas linealmente y separadas por una distancia L . Las masas están acopladas mediante resortes [13] con el mismo valor constante de rigidez k , tal como muestra la Fig. 4.

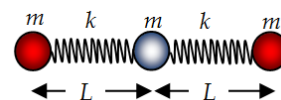


Fig.4. Cadena unidimensional de tres masas iguales.

Las masas 1, 2 y 3 ocupan las posiciones x_1 , x_2 y x_3 respectivamente. Estas masas sólo pueden desplazarse en la dirección de la cadena, es decir que sólo pueden vibrar longitudinalmente y sólo son afectados por las fuerzas de restitución elásticas de los resortes (Ley de Hooke).

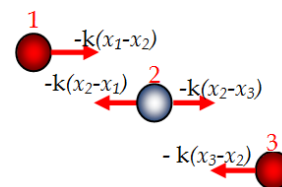


Fig.5. Análisis de fuerzas sobre cada masa.

Del análisis de fuerzas sobre cada masa mostrada en la Fig. 5, deducimos que las ecuaciones diferenciales del movimiento de las masas están dadas por:

$$\begin{cases} m \frac{d^2 x_1}{dt^2} = -k(x_1 - x_2) \\ m \frac{d^2 x_2}{dt^2} = -k(x_2 - x_1) - k(x_2 - x_3) \\ m \frac{d^2 x_3}{dt^2} = -k(x_3 - x_2) \end{cases} \quad (1)$$

El sistema de ecuaciones (1) se puede escribir también de la forma

$$\begin{cases} \frac{dv_1}{dt} = -\frac{k}{m}(x_1 - x_2) \\ \frac{dv_2}{dt} = -\frac{k}{m}(x_2 - x_1) - \frac{k}{m}(x_2 - x_3) \\ \frac{dv_3}{dt} = -\frac{k}{m}(x_3 - x_2) \end{cases} \quad (2)$$

donde v_1, v_2, v_3 representan la velocidad de las masas.

Adicionalmente debemos considerar el siguiente sistema de ecuaciones para las velocidades.

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = v_1 \\ \frac{dx_2}{dt} = v_2 \\ \frac{dx_3}{dt} = v_3 \end{cases} \quad (3)$$

Diferenciando las ecuaciones (2) y (3) tenemos

$$\begin{cases} dv_1 = \left[-\frac{k}{m}(x_1 - x_2) \right] dt \\ dv_2 = \left[-\frac{k}{m}(x_2 - x_1) - \frac{k}{m}(x_2 - x_3) \right] dt \\ dv_3 = \left[-\frac{k}{m}(x_3 - x_2) \right] dt \\ dx_1 = v_1 dt \\ dx_2 = v_2 dt \\ dx_3 = v_3 dt \end{cases} \quad (4)$$

Ahora discretizamos las ecuaciones (4) considerando la equivalencia $dv \equiv v_{i+1}^1 - v_i^1$, donde el superíndice 1 indica la masa 1, y donde i representa el paso presente y $i+1$ representa el paso siguiente en el cálculo iteracional. Tenemos entonces:

$$\begin{cases} v_{i+1}^1 = v_i^1 - \left[\frac{k}{m}(x_i^1 - x_i^2) \right] \Delta t \\ v_{i+1}^2 = v_i^2 - \left[\frac{k}{m}(x_i^2 - x_i^1) + \frac{k}{m}(x_i^2 - x_i^3) \right] \Delta t \\ v_{i+1}^3 = v_i^3 - \left[\frac{k}{m}(x_i^3 - x_i^2) \right] \Delta t \\ x_{i+1}^1 = x_i^1 + v_{i+1}^1 \Delta t \\ x_{i+1}^2 = x_i^2 + v_{i+1}^2 \Delta t \\ x_{i+1}^3 = x_i^3 + v_{i+1}^3 \Delta t \\ t_{i+1} = t_i + \Delta t \end{cases} \quad (5)$$

Utilizamos ahora la integración de Euler – Cromer [14] con los siguientes pasos:

Para cada paso i calcular v y x al paso $i + 1$.

➤ Calcular la velocidad en el paso $i + 1$ para cada partícula $j = 1, 2, 3$.

$$v_{i+1}^j = v_i^j - a_i^j \Delta t$$

donde a_i^j es la aceleración de la partícula j en el paso i .

➤ Calcular la posición en el paso $i + 1$ para cada partícula $j = 1, 2, 3$.

$$x_{i+1}^j = x_i^j + v_{i+1}^j \Delta t$$

➤ Calcular el tiempo en el paso $i + 1$

$$t_{i+1} = t_i + \Delta t$$

➤ Mostrar la animación gráfica en pantalla

➤ Repita hasta completar todos los pasos

La técnica explicada se puede generalizar al caso de N masas m dispuestas linealmente, y con resortes de rigidez k intercalados entre las masas, tal como se muestra en la Fig. 6.

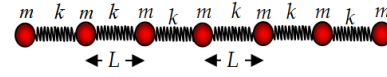


Fig.6. Arreglo periódico de masas en forma lineal.

B. Osciladores armónicos bidimensionales

Extendamos lo desarrollado en el caso lineal anterior al caso bidimensional [15]. Consideremos un conjunto de cinco masas que constituirán nuestra base inicial para la construcción de redes en dos dimensiones donde las masas m están separadas por una distancia L horizontal y vertical. Dichas masas están acopladas mediante resortes con el mismo valor de rigidez k , tal como muestra la Fig. 7.

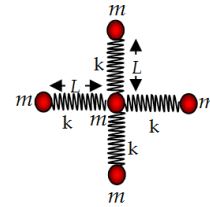


Fig.7. Base inicial para la construcción de redes bidimensionales.

Para facilitar la implementación computacional consideremos la ubicación de la masa central como (i, j) , la masa derecha como $(i+1, j)$, la masa izquierda como $(i-1, j)$, la masa superior como $(i, j+1)$ y la masa inferior como $(i, j-1)$, tal como se muestra en la Fig. 8.

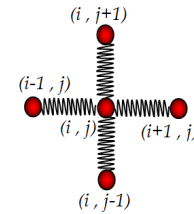


Fig.8. Ubicación de las masas para la implementación computacional.

De esta manera las ecuaciones diferenciales aplicadas a la masa central, estarán dadas por

$$\begin{cases} \frac{d^2 x_{i,j}}{dt^2} = -\frac{k}{m}(x_{i+1,j} - 2x_{i,j} + x_{i-1,j}) \\ \frac{d^2 y_{i,j}}{dt^2} = -\frac{k}{m}(y_{i,j+1} - 2y_{i,j} + y_{i,j-1}) \end{cases} \quad (6)$$

Donde $x_{i,j}$ y $y_{i,j}$ representa la posición de la masa central en el plano de la Fig. 8. El sistema de ecuaciones (6) se aplicará a las demás masas que conforman la red cristalina. Por ejemplo una red de nueve masas horizontales y cinco masas verticalmente tendrá los subíndices $i = 1, 2, \dots, 9$ y $j = 1, 2, \dots, 5$.

C. Osciladores armónicos tridimensionales

Finalmente extenderemos el desarrollo a un arreglo tridimensional de masas [16,17]. Consideremos un conjunto de siete masas m que constituirán nuestra base inicial para la construcción de redes en tres dimensiones. Las masas están separadas por una distancia L a lo largo de las tres direcciones ortogonales y están acopladas mediante resortes con el mismo valor de rigidez k . En forma similar al caso bidimensional, facilitaremos la implementación computacional en tres dimensiones considerando la ubicación de la masa central como (i, j, k) , y las demás masas van sumándose o restándose en 1 a estos índices, tal como se muestra en la Fig. 9.

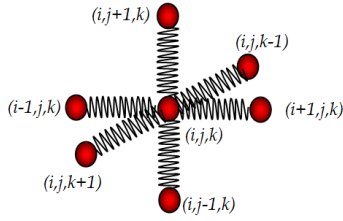


Fig.9. Base inicial para la construcción de redes tridimensionales.

De esta manera las ecuaciones diferenciales aplicadas a la masa central, estarán dadas por

$$\begin{cases} \frac{d^2 x_{i,j,k}}{dt^2} = -\frac{k}{m}(x_{i+1,j,k} - 2x_{i,j,k} + x_{i-1,j,k}) \\ \frac{d^2 y_{i,j,k}}{dt^2} = -\frac{k}{m}(y_{i,j+1,k} - 2y_{i,j,k} + y_{i,j-1,k}) \\ \frac{d^2 z_{i,j,k}}{dt^2} = -\frac{k}{m}(z_{i,j,k+1} - 2z_{i,j,k} + z_{i,j,k-1}) \end{cases} \quad (7)$$

Donde $x_{i,j,k}$, $y_{i,j,k}$ y $z_{i,j,k}$ representa la posición de la masa central en el espacio.

El sistema de ecuaciones (7) se aplicará a las demás masas que conforman la red cristalina tridimensional adicionándole o restando 1 a los índices i, j, k . No confundir el k en cursiva del índice con el k de rigidez del resorte que está sin cursiva.

D. Oscilador bidimensional no lineal de tres masas

Con la finalidad de encontrar aplicaciones a una mayor cantidad de moléculas, se considera un caso especial de tres

masas acopladas con tres resortes de constante de rigidez k y distribuidas en distintos puntos del plano, tal como muestra la Fig. 10.

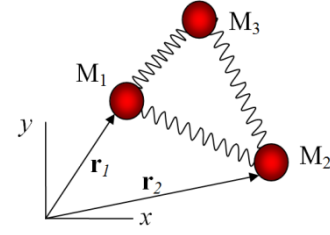


Fig.10. Arreglo bidimensional de tres osciladores no lineales.

Las ecuaciones para este sistema están dadas por

$$\begin{cases} \frac{d^2 \vec{r}_1}{dt^2} = -\frac{k}{M_1}(\Delta \vec{r}_{12} + \Delta \vec{r}_{13}) \\ \frac{d^2 \vec{r}_2}{dt^2} = -\frac{k}{M_2}(\Delta \vec{r}_{21} + \Delta \vec{r}_{23}) \\ \frac{d^2 \vec{r}_3}{dt^2} = -\frac{k}{M_3}(\Delta \vec{r}_{31} + \Delta \vec{r}_{32}) \end{cases} \quad (8)$$

Donde \vec{r}_1 , \vec{r}_2 , \vec{r}_3 son los vectores de posición de las masas M_1 , M_2 , M_3 respectivamente y $\Delta \vec{r}_{ij}$ es el desplazamiento entre las masas i y j a partir de su posición de equilibrio.

III. IMPLEMENTACIÓN

Con la finalidad de realizar experimentos, se implementó un prototipo de software (gráfico) empleando la biblioteca OpenGL [18]. OpenGL actualmente se encuentra en su versión 4.5, aunque para la experimentación de nuestro estudio y la obtención de resultados no ha sido necesario emplear características avanzadas de esta última versión de OpenGL, ya que la característica principal de nuestros experimentos trata de arreglos de masas (1D, 2D o 3D), por lo que nos sugiere usar colecciones de tipos de datos iguales (masas). Siendo así, ha sido conveniente utilizar la característica VBO (Vertex Buffer Object) que viene disponible desde la versión 2.0 de la biblioteca OpenGL y es soportado por los procesadores gráficos (GPUs) actuales.

IV. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Al realizar la simulación unidimensional, se consideró la configuración de la molécula lineal de Dióxido de Carbono (CO_2), la cual está compuesta de un átomo de Carbono de masa 12.0107 u y de dos átomos de Oxígeno cada uno con masa 15.9994 u. Ajustando adecuadamente las condiciones iniciales para la posición de los átomos se simuló gráficamente dos modos normales para esta molécula, el modo de vibración de tensión simétrica [13] y el modo de tensión asimétrica (stretching) mostrados en la Fig. 11, donde las esferas rojas representan los átomos de oxígeno y la esfera celeste el átomo de carbono.

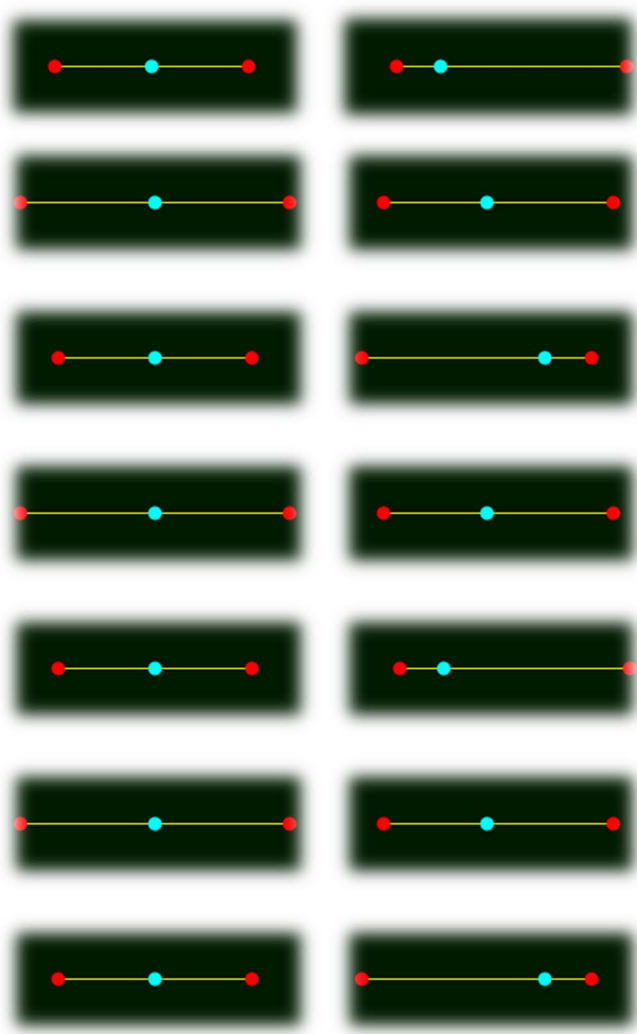


Fig.11. Tensión simétrica (lado izquierdo) y tensión asimétrica (lado derecho).

Notamos en ambas simulaciones el movimiento de stretching de los átomos de oxígeno y del carbono como predice la teoría cuántica.

Así mismo se consideró la configuración bidimensional de la molécula de agua (H_2O) la cual está compuesta de un átomo de Oxígeno de masa 15.9994 u y de dos átomos de Hidrógeno cada uno con masa 1.00794 u. Ajustando adecuadamente las condiciones iniciales para la posición de los átomos se simuló gráficamente tres modos normales para esta molécula, el modo de vibración de tensión simétrica (stretching), el modo de vibración asimétrica (stretching) y el modo de vibración de flexión de tijera (bending) mostrados en la Fig. 12, donde las esferas blancas representan los átomos de hidrógeno y la esfera roja el átomo de oxígeno.

Notamos el movimiento de stretching en las dos primeras columnas donde los átomos de hidrógeno se acercan y alejan del oxígeno. Así mismo en la tercera columna notamos el movimiento blending donde los átomos de hidrógeno realizan

un movimiento de tipo tijera, tal como predice la teoría cuántica.

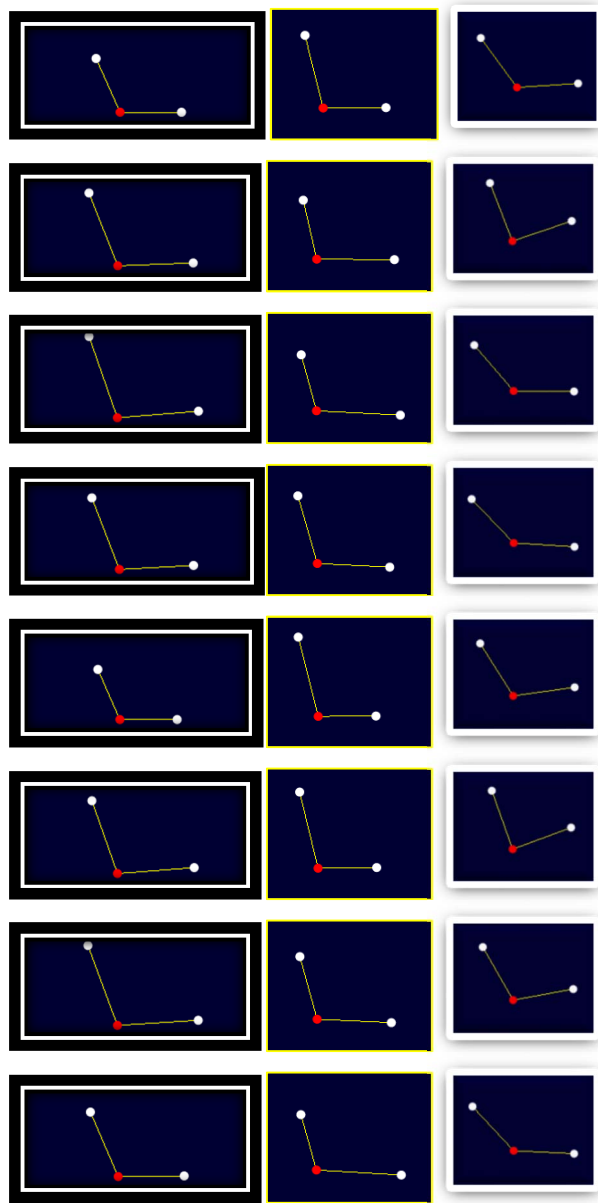


Fig.12. Tensión simétrica (lado izquierdo), tensión asimétrica (centro) y flexión de tijera (lado derecho).

Al realizar la simulación tridimensional, se consideró la configuración del cristal cúbico de Plutonio (Pu) debido a que este elemento es el único que presenta esta configuración especial como arreglo cúbico en la naturaleza. La masa del átomo de Plutonio es 244 u y ajustando adecuadamente las condiciones iniciales de la posición de los átomos en un cristal cúbico 2x2, se simuló gráficamente dos modos normales, de los 18 que existen para este cristal. Se simuló el modo de vibración de tipo “achatación” lateral y el modo de vibración de tipo “respiración” representados en la Fig. 13.

Notamos que el movimiento de los átomos no deforma apreciablemente la estructura ortogonal cúbica del cristal, lo que si se manifiesta en otros modos normales que existen.

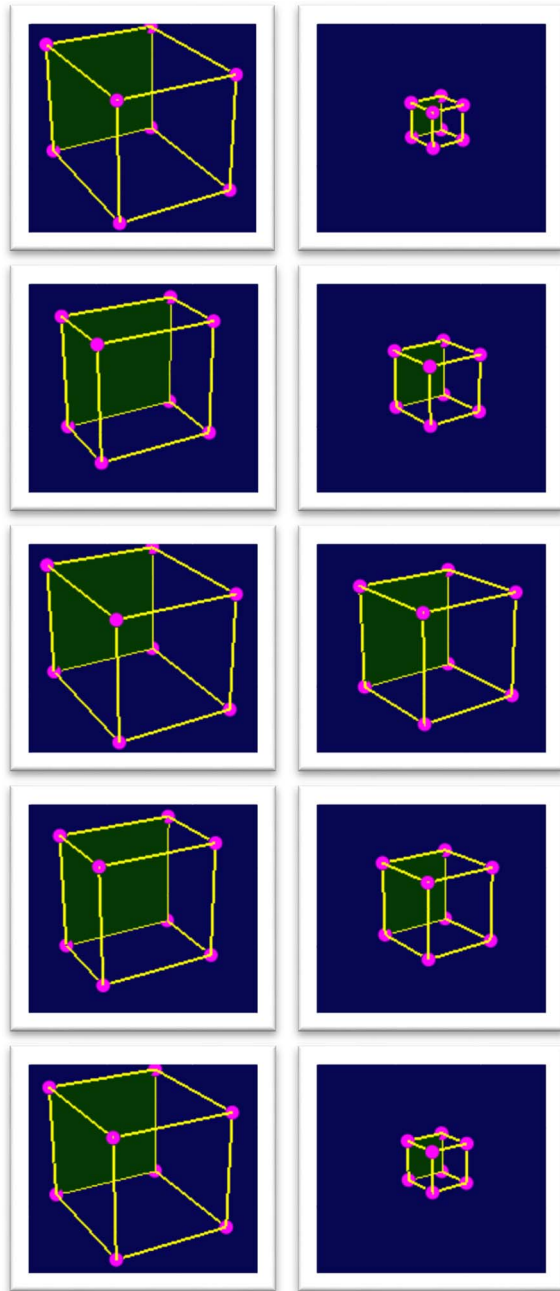


Fig.13. Modos de tipo "Achatamiento" (lado izquierdo) y "respiración" (lado derecho).

Adicionalmente se realizaron algunas pruebas para casos de cristales hipotéticos o ideales, esto con la finalidad de exigir el modelo y determinar su capacidad de pronosticar comportamientos no contemplados en un laboratorio. Para el caso bidimensional se consideró cuatro masas dispuestas en los vértices de un cuadrado. La animación mostró una vibración simétrica de los átomos en el modo normal en que los

desplazamientos de las masas eran diagonales hacia afuera y hacia dentro tipo "respiración", tal como lo muestra la Fig. 14.

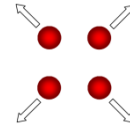


Fig.14. Modo normal de desplazamientos hacia afuera y dentro.

Para el caso tridimensional se consideró ocho masas dispuestas en los vértices de un cubo. La animación mostró una vibración simétrica de los átomos en el modo normal en que los desplazamientos de las masas eran hacia afuera y hacia el centro del cubo, también tipo "respiración" tal como lo muestra la Fig. 15.

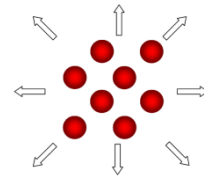


Fig.15. Modo normal de desplazamientos tipo "respiración".

Adicionalmente se probó con configuraciones lineales y no lineales de mayor número de átomos, dando como resultado animaciones en la que los átomos vibraban asimétricamente y simétricamente, desplazándose en formas similares a las ya expuestas (ver Fig. 16 - 18)



Fig.16. Arreglo lineal de 10 iones.

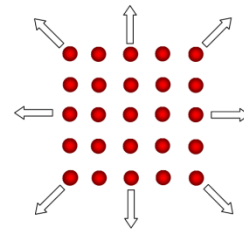


Fig.17. Arreglo bidimensional 25 iones.

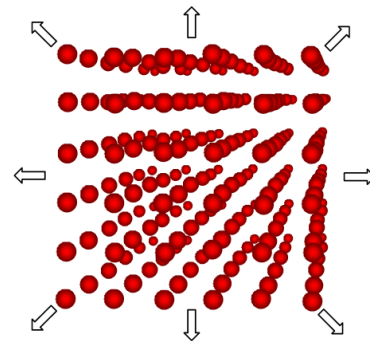


Fig.18. Arreglo tridimensional cúbico de 216 iones.

Como una muestra de la capacidad del modelo para resolver situaciones mucho más complejas, se ha simulado una mayor cantidad de iones en estructuras ideales que interactúan con otros objetos, esto como posible aplicación a efectos piezoeléctricos en ciertos cristales.

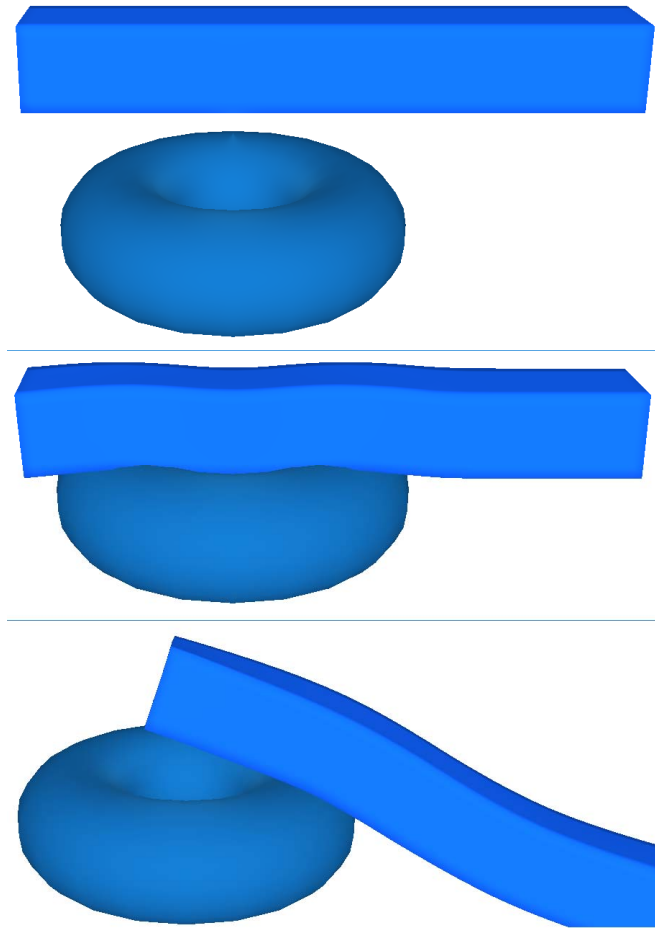


Fig.19. Una barra deformable, representada por una red cristalina de 5000 iones, se deja caer sobre un obstáculo rígido (toro) estático. En el cuadro en medio se muestra la resolución de contactos cuando impacta con el obstáculo. En el cuadro final (abajo) se muestra el comportamiento de la simulación luego de algunos cuadros, debido a que la mayor parte de la barra se encuentra al lado derecho.

Para la experimentación con las configuraciones de redes presentadas en la Fig. 19, se ha utilizado el prototipo implementado en un computador equipado con Procesador i7 5820K, memoria 8GB DDR4 y GPU nVidia 760 GTX. Aunque los experimentos sencillos no requieren de un equipo (computador) con mucha capacidad computacional, una configuración como la presentada en la Fig. 19 ya requiere de un computador con características como las utilizadas en nuestros experimentos, principalmente si se quiere interactuar en tiempo real y más aún si se considera la interacción entre objetos [20, 21] (tratamiento y resolución de contactos) como los mostrados en la Fig. 19.

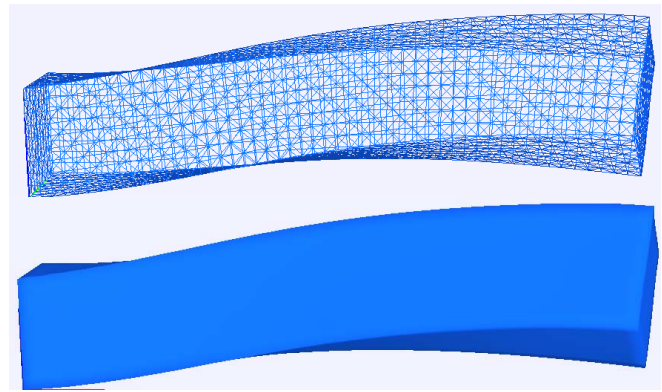


Fig.20. Una barra deformable, representada por una red cristalina de 5000 iones al cual se le ha implementado efectos de torsión y doblado.

La Fig. 20 muestra una configuración con 5000 iones, al cual se le ha integrado la posibilidad de manipular en cualquiera de sus partículas y por lo tanto se puede conseguir algunos efectos como la torsión y doblado, esto pudiera servir para el estudio de restitución geométrica de algunos materiales dieléctricos.

Las simulaciones del presente trabajo sólo han tenido como objetivo principal representar gráficamente la vibración de algunas moléculas y cristales reales e hipotéticos. No se ha considerado realizar cálculos de frecuencias de vibración, números de onda, temperatura del sistema y otras más, debido a que el campo de estudio es realmente muy amplio, pero esto no restringe en demasía las aplicaciones prácticas que se le pueden dar al modelo como ya se ha demostrado en los resultados previos.

V. CONCLUSIONES

Como conclusiones podemos destacar que:

- Es posible aplicar el modelo Spring-Mass al movimiento vibracional de una red de iones o red cristalina y analizar su movimiento en forma gráfica, esto considerando adecuadamente las posiciones iniciales de las masas.
- Aunque determinar los modos normales de moléculas y redes cristalinas por medios analíticos es una tarea ardua debido al uso de métodos mecánico cuánticos, el presente trabajo demuestra que se puede realizar una simulación numérica de dichas vibraciones con aproximación armónica para determinar algunos modos normales de una forma cualitativa, rápida y flexible.
- Se ha simulado adecuadamente dos modos normales del Dióxido de Carbono verificando en una animación gráfica los movimientos de stretching simétricos y asimétricos.
- Se ha simulado adecuadamente los tres modos normales del agua verificando en una animación gráfica los movimientos de stretching simétrico y asimétrico y blending tipo tijera.
- Los resultados visuales simulados son de interés particular en espectroscopía química, donde el movimiento de vibración de las moléculas pudiera determinar la composición de materiales más complejos.

- El modelo ha demostrado poseer un potencial interesante para la aplicación en vibraciones de moléculas y cristales de mayor número de iones.
- El poder visualizar las vibraciones con aproximación armónica mediante una animación gráfica permite entender mejor algunas características de los materiales y comprender mejor la física del estado sólido.
- El modelo puede ser modificado adecuadamente para la simulación de vibración de redes cristalinas complejas como el Cloruro de Sodio, el cristal Grafeno, el cristal de Silicio, etc.

REFERENCIAS

- [1] Hartmut Geyera, Andre Seyfartha, Reinhard Blickhanb, "Spring-mass running: simple approximate solution and application to gait stability", *Journal of Theoretical Biology*, Elsevier 2004.
- [2] R. Blickhan, "The Spring Mass model for running and hopping", *J. Biomechanics*, Vol. 22, No. 11/12, pp 1217, 1989. Harvard University.
- [3] Hartmut Geyer, Andre Seyfarth, Reinhard Blickhan, "The spring-mass model for walking", *ISB XXth Congress - ASB 29th Annual Meeting*, July 31 - August 5, Cleveland, Ohio.
- [4] Xavier Provot, "Deformation Constraints in a Mass Spring Model to Describe Rigid Cloth Behavior", *Institut National de Recherche en Informatique et Automatique INRIA, Francia*, 1996.
- [5] Demetri Terzopoulos, John Platt, Alan Barr, Kurt Fleischert. *Elastically Deformable Models*. *Computer Graphics*, Volume 21, Number 4, July 1987.
- [6] Andrew Selle, Michael Lentine, Ronald Fedkiw, "A Mass Spring Model for Hair Simulation", *SIGGRAPH 2008*. Article No. 64.
- [7] F.L. Pérez-Sánchez, F. Pérez-Rodríguez, "Fonones en cristales con estructura de diamante", *Revista Mexicana de Física* 50 (2) 96–103, diciembre 2004, Instituto de Física, Universidad Autónoma de Puebla, México.
- [8] Arafa H. Aly, Ahmed Mehaney, Hassan S. Hanafey, "Phononic Band Gaps in One Dimensional Mass Spring System", *Progress In Electromagnetics Research Symposium Proceedings*, KL, MALAYSIA, March, 2012, Physics Department, Faculty of Sciences, Beni-Sef University, Egypt.
- [9] P. G. Martinsson, A. B. Movchan, "Vibrations of Lattice Structures and Phononic Band Gaps", *Q J Mechanics Appl Math* (2003) 56 (1): 45-64.
- [10] Philip Phillips, *Advanced Solid State Physics*, University of Illinois, Urbana-Champaign, Westview Press, USA, pp. 11, pp.239, 2003.
- [11] B. Shan, L. Wang, S. Yang, J. Hyun, N. Kapur, Y. Zhao, J.B Nicholas, K. Cho, "First-principles-based embedded atom method for PdAu nanoparticles", *Phys. Rev. B* 80, 035404 (2009).
- [12] M. Sánchez Castellanos, R. Lemus, M. Carvajal, F. Pérez Bernal, "A novel connection between algebraic spectroscopic parameters and force constants in the description of vibrational excitations of linear triatomic molecules", *Journal of Molecular Spectroscopy*, 2008.
- [13] Roberto Lavín, Julio Pozo, "El estudio y enseñanza de los modos vibracionales de la molécula triatómica", *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 33, n. 1, 1301 (2011).
- [14] Nicholas J. Giordano, Hisao Nakanishi, *Computational Physics*, pp. 52, Pearson, Prentice Hall, 2006.
- [15] Zhan John Cao, "One and Two-Dimensional Mass Spring Computational Model for Phononic Band Gap Analysis", *Thesis requirement for the degree of Master of Applied Science in Electrical and Computer Engineering*, Waterloo, Ontario, Canada, 2009.
- [16] A J Pretlove, *BASIC Mechanical Vibrations*. Department of Engineering, University of Reading, pp. 79, London, 1985.
- [17] S. Graham Kelly, *Mechanical Vibrations, Theory and Applications*, pp. 533, Cengage Learning, 2012, USA.
- [18] Sumanta Guha. *Computer Graphics – OpenGL*. CRC Press, Taylor & Francis Group. 2015.
- [19] Charles Kittel, *Introducción a la Física del estado Sólido*, pp. 212, 2da edición, Ed. Reverté, 1975.
- [20] YP Atencio, C Esperanca, PR Cavalcanti, A Oliveira, "A collision detection and response scheme for simplified physically based animation", *Computer Graphics and Image Processing*, SIBGRAPI 2005, 2005.
- [21] YP Atencio, GS Alzamora, C Esperança, "Enhanced Physically-Based animation of deformable bodies using shape-matching", *Computers in Entertainment (CIE)*, 2009.